



TITLE:

研究会報告(非周期系物性の基礎理論,基研研究会報告)

AUTHOR(S):

堀, 淳一

CITATION:

堀, 淳一. 研究会報告(非周期系物性の基礎理論,基研研究会報告). 物性研究 1968, 10(6): F18-F23

ISSUE DATE:

1968-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/86760>

RIGHT:

研究会報告

堀 淳 一

1. 無秩序系のスペクトルの理論における最近の発展

1次元無秩序系のスペクトルの厳密な理論としては、1965年までにはほぼ phase theory が確立され、peak structure や Saxon-Hutner の定理、及び special frequency (SF) などの、無秩序系のスペクトルの持つ特徴的性質の本性が解明された。しかもこの理論は高次元への拡張が困難であるという欠点をもっている。Matsuda-Okada は1964年にこの拡張をこころみ、形式的には拡張可能であることを示したのであるが、数学的困難のために、具体的な結論としてはごく弱いものしか得ることができなかった。そこで1965年以後においては、このような次元の制約から自由な別の方法を見出すことに力が注がれることになった。

¹⁾
Matsuda は1966年に、islandization の方法と呼ばれる新しい方法を案出し、それを用いて2つの2原子格子の混晶の振動数スペクトルに対して、混晶が isotopic であり、原子間の相互作用が最近接相互作用に限られていて、かつ相互作用がある種の対称性をみたしているならば、Saxon-Hutner の定理がなりたつことを示した。即ちA原子とB原子とからなる2原子格子 (AB格子)、A原子とC原子とからなる2原子格子 (AC格子)、及びこれらの混晶 — 1つの sublattice の上には常にA原子があるが、もう1つの sublattice の上にはB原子とC原子とが、random に分布している結晶 — を考えると、AB格子とAC格子に共通なスペクトルの gap は必ず同時に混晶のスペクトルの gap にともなっているというのである。従ってAB格子の optical band とAC格子の optical band の間に gap があるときには混晶の赤外吸収スペクトルは自己主張型となり、gap がないときには融合型となることが予想される。この予想はモデルの単純さを考えると驚く程よく実験事実と合致する。

^{2) 3)}
Hori は1967年に evaporation の方法と呼ばれる更に一般的な方法を考え、系が最近接相互作用をもちかつ高い対称性をもたなければならない

という条件なしに, Saxon-Hutner の定理が一般的に成立⁴⁾することを証明した。この evaporation の方法についてはその後 Wada⁵⁾ がやや量子方法を考え, Toda⁶⁾ が更に簡単な別法を提案し, また Matsuda⁶⁾ によってこれが Hermite 形式の固有値に関する一般的な定理の特別な場合にほかならないことが指摘されるなどの発展があった。従って Saxon-Hutner 型の定理は, 振動数スペクトルの場合に限らず一般に Hermite 形式のハミルトニアンで記述される任意の系に対してなりたつことになり, 種々の系に対して応用出来ることが期待される。

無秩序格子のスペクトルの peak structure に関しては, 多次元の場合⁷⁾にも 2 次元と同様に議論することができることが 1966 年に示されたので, 定量的な計算はともかく, 本質的なことはすでに解決されている。SF については 1966 年に Matsuda⁸⁾ が, isotopic な 2 原子無秩序格子の場合に対して, 全ての island frequency (軽い原子の cluster が無限に重い原子の間にはさまれている時にもつ固有振動数) は質量 α がそれぞれの frequency に特有な臨界値をこえると SF になり得ることを示したが, 実際にそれぞれの SF の臨界質量比を求めることが問題として残されていた。^{9) 10)} Hori 及び Wada は, 上記の evaporation の方法と, Dean¹¹⁾ が自己随伴演算子の固有値の bound に関する Kato の定理¹²⁾を拡張することによって導いた impurity frequency または impurity band の bound に対する公式とを併用することによって, 臨界質量比を estimate することができることを示した(くわしくは Wada の報告を参照されたい)。Hori-Wada の仕事に対しては, モデルが realistic でないという批判があったが, この仕事の目的は, SF というものの nature を具体的に示すこと, 及び臨界質量比を estimate することが原理的に可能であることを示すことにあるのであって, 理論のカーブを実験と合わせることにあるのではないから, この批判は筋ちがいである。

以上のように, スペクトルの gap に関しては高次元系に対してもかなり研究が進み, definite な結論が得られるようになってきた。また, peak structure についてもその本性はすでに明らかにされた。しかし具体的なスペクトル密度の計算は, Bacon, Dean, Visscher, Payton¹³⁾ 等の

computer による直接的計算を除いては未だあまり進んでいない。この点で最近 Matsuda, Ogita, Okada¹⁴⁾ 等が行っている MEAPS による coarse-grained spectrum の計算と, Matsubara 及び Yonezawa¹⁵⁾ が行っている Green 関数の diagram expansion によるスペクトルの計算が注目される。MEAPS というのは要求されるスペクトルの精度即ち coarse-graining の度合に応じて、無秩序格子のスペクトルを適当にえらんだ規則格子の組のスペクトルの平均でおきかえるという方法である。実際に我々が観測する物理量は多少とも coarse-graining された量であるから、この方法は実用上の有効さが期待できると同時に、理論的にもマクロな観測の問題や coarse-grained propagator の問題と関連して興味があり、理論的な基礎づけを更に深めることが必要であろう。

Green 関数の diagram expansion の方法は、phase theory のような次元の制約はなく、また種々の物理現象を説明するのに有力であるため、無秩序格子のスペクトルに対しても強力な武器になることが期待されたが、予想に反して多数の研究者の努力にも拘わらず、その手続きの繁雑さのわりには一般に計算機実験の結果とも、また厳密な理論の与える結論とも著しく違った結果しか生み出すことができなかった。しかし最近 Matsubara - Yonezawa の研究によってこの難点が次第に克服されつつあることは喜ばしく、近い将来手続きの複雑さに見合うだけの信頼できる結論が得られるようになることが期待される。また Onodera 及び Toyozawa¹⁷⁾ は、Matsubara - Yonezawa の方法にもとずいて、混晶のスペクトルに対する功妙な内挿式を求めた。これによると、Saxon-Hutner の条件がみたされないときにもスペクトルが自己主張型になる場合がある。このことが、どのような近似において正しいのかを吟味するのは興味ある問題であろう。

無秩序格子のスペクトルに関する研究は、大ざっぱに言ってかなりタイプの違った2つの種類の研究に分類できる。1つは MEAPS や diagram expansion の方法のように、直接実験結果と比較できる結果を出すことを目的とする研究であり、もう1つは phase theory や Saxon-Hutner の定理の定式化のように、実験との直接的な比較よりはむしろ現象の nature を根本にさかのぼって追求する研究である。研究会の析 informal disc-

ussion において用いられたコトバを借用して、便宜的に前者をプラグマティズム、後者を深刻派と呼ぶことにしよう（前者を楽観派、後者を懐疑派といってもよいかもしれない）。この2つのタイプの研究は、基礎科学と技術とが互に相補い、互に刺激し合いながら発達してきたのと同様に、互に相補い、互に刺激し合って伸びてゆくべきものであろう。カーブを実験と合わせることとは勿論、理論物理の1つの重要な仕事に違いないが、ある現象の nature を明らかにすること、即ちこの現象は原理的にはこういうことなのだというをはっきりさせることも少くともそれと同等に重要なことであろう。別のたとえ方をすれば、深刻派の研究は根をしっかりと張らせることに、プラグマティックな研究は花や葉をしげらせることに相当するともいえよう。花と根の両方がなくては木全体の成長がないように、両者のタイプの研究がともになければ物理学全体の健全な発展は望めないと考える。今回の研究会において、異なるタイプの研究の足をひっぱるような論調がともすれば見うけられたのは大変残念なことであった。仕事の具体的な内容について、建設的な批判を行うことはもちろん必要なことであるが、頭ごなしに異なるタイプの仕事を無意味と決めつけるような議論は不毛な議論であろう。どちらのタイプの研究を得意とするかは個々の研究者のタイプによることであって、無意味と決めつけられたからといって、決めつけられた方がハッそうですか、それではやめましようというわけのものではないのだから。筆者自身は深刻派に属するが、好みとしてプラグマティックな仕事が肌に合わないというだけであって、プラグマティックな研究が無意味であるとは毛頭思わない。

Diagram 展開の方法についても、その多体問題における重要性は認識しているつもりである。ただそれがあらゆる現象に対して万解であるとは思わないし、それに含まれる近似の性格のあいまいさがいつも気になるので、時々苦言を呈したくなるだけである。上にのべた相互刺激という意味で、phase theory やその他の厳密な方法の展開が、Diagram の方法の最近の発展にとっていくらかでも incentive であったとすれば、大変嬉しいことと思うのである。

2. 非周期系の固有モードの localization について

研究会では無秩序結晶内における波の減衰に関する Rubin の最近の仕事を紹介し、あわせてこれと固有モードの localization との関連についての私見をのべたのであるが、これについてはすでに物性研究の 5 月号に書いたのでここでは省略する。ただし時間の関係で、Rubin の仕事の意義を十分説明出来なかったのは残念であった。彼が得た無秩序結晶を通過する波が必ず減衰するという結論がたまたま直観的にも最もらしいことであったために、常識的なことをわざわざ計算してみたにすぎない演習問題的な研究という評価が一部の方々からなされたのであるが、常識的なことがいつも正しいとは限らないのであって、例えば special frequency や peak structure など今でこそ常識だが、それが発見された当時は決して常識的なことではなく、むしろそういうものは、ないという statement の方が常識的だったのである。Rubin の計算にしても、計算の結果非常に奇妙な結果がもし出たとすれば（その可能性が小さいと頭から決めてかかることは決して出来ない、 \nearrow ）誰も彼の計算を演習問題と決めつけるわけにはいかなかったであろう。いわゆる常識的なものを少くとも一応は疑い、やってみなければ本当のことはわからないと考えるのが深刻派の立場なのであって、これが一見疎遠に見えるかもしれないが、結局は理論の根を深めてより大きな花を咲かせるもとになるはずであると考えてるのである。更に Rubin の仕事は単に無秩序結晶の中では波がいつも減衰するというを示したのに止まるものではなく、減衰率の upper bound と lower bound を実際に計算しており、その frequency-dependence は理論的な興味があるし、また私が物研 5 月号に書き、また研究会でも詳しく話す予定があったように、無秩序系における固有モードの localization という現象の本質に関して、極めて有益な示唆を与えるのであって、少くとも深刻派の立場からみると、重要な仕事と考えられるのである。これ以上“不毛の議論”をすることは貴重な紙面と、筆者及び読者双方の時間とエネルギーの浪費であると思うので、ここで筆をおくことにする。

(1968, 7, 5)

参 考 文 献

- 1) H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. 38 (1967) 512
- 2) J. Hori, Proc. Phys. Soc. 92 (1967) 977
- 3) J. Hori, J. Phys. C (Proc. Phys. Soc.) 1 (1968) 312
- 4) K. Wada, 私信
- 5) M. Toda, 物研 8 (1967) F49
- 6) H. Matsuda, 私信
- 7) J. Hori and M. Fukushima, JAERI 1113 (1966) 55
- 8) H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. 36 (1966) 1070
- 9) J. Hori, J. Phys. C (Proc. Phys. Soc.) 1 (1968) 304
- 10) K. Wada and J. Hori, 統計力学国際会議において発表予定, この研究会報告の中の Wada の報告参照
- 11) P. Dean, J. Phys. C (Proc. Phys. Soc.) 1 (1968) 22
- 12) T. Kato, J. Phys. Soc. Japan 4 (1949) 334
- 13) P. Dean and M. D. Bacon, Proc. Roy. Soc. 81 (1963) 642;
D. N. Payton and W. M. Visscher, Phys. Rev. 154 (1967) 802
- 14) H. Matsuda, Suppl. Prog. Theor. Phys. 36 (1966) 97;
H. Matsuda and N. Ogita, Prog. Theor. Phys. 38 (1967) 81;
K. Okada and H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. 39 (1968) 1153
- 15) T. Matsubara and F. Yonezawa, Prog. Theor. Phys. 35 (1966) 357; F. Yonezawa, Prog. Phys. 31 (1964) 357;
F. Yonezawa and T. Matsubara, Prog. Theor. Phys. 35 (1966) 759; F. Yonezawa, 物研 10 (1968) 118
- 16) H. Matsuda, 物会誌 22 (1967) 491
- 17) Y. Onondera and Y. Toyozawa, J. Phys. Soc. Japan 24 (1968) 341